

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт математики и фундаментальной информатики  
Базовая кафедра вычислительных и информационных технологий

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

 / В.В.Шайдуров

«15» июня 2016 г.

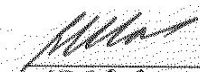
**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ДОМЕНОВ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ**

Направление 02.04.01 Математика и компьютерные науки

Магистерская программа 02.04.01.01 Математическое и компьютерное  
моделирование

Научный руководитель  
доктор физико-математических наук,  
профессор

 / В.В. Шайдуров  
15.06.2016

Выпускник

 / В.С. Корниенко  
15.06.2016

Красноярск 2016

## АННОТАЦИЯ

Цель работы - моделирование взаимодействия большого числа электрических дипольных частиц между собой, внешним полем и заряженными частицами.

В работе предложена физико-математическая модель и реализующий ее вычислительный алгоритм для исследования поведения частиц, обладающим электрическим дипольным моментом во внешнем электрическом поле. Вычислительные эксперименты демонстрируют ориентационную динамику кластеров с нарастанием порождаемого поля. Также рассмотрены устойчивые во времени образования из частиц с дипольным моментом и их взаимодействие с ионными парами.

Магистерская диссертация по теме «Математическое моделирование динамики доменов электрического поля» содержит 33 страницы текста, 1 приложение, 18 использованных источников, 9 рисунков.

Ключевые слова: диполь, электрическая частица, заряженная частица, электрическое поле, физико-математическая модель, вычислительный эксперимент, методы рунге-кутты.

## **ABSTRACT**

The purpose of study is simulation of a large number of electric dipole particles with each other, the external field and charged particles.

In the study, a physical-mathematical model and a computational algorithm implementing the model are proposed to study the behavior of particles having an electric dipole moment in an external electric field. Computational experiments demonstrate the orientation dynamics of water clusters with the increase of the generated field. In addition, stable dipole formation and their interactions with ion pairs is considered.

The master thesis entitled "Mathematical modeling of the dynamics of the domain of electric field" contains the 33 pages of text, the 1 application, the 18 used sources, 9 pictures.

Keywords: dipole, electric particle, charged particle, electric field, physical and mathematical models, computational experiments, runge-kutta methods.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1 Модель электрической дипольной частицы.....	8
1.1 Электрический диполь .....	8
1.2 Кластеры .....	9
1.3 Использование HyperChem в молекулярном моделировании .....	10
1.4 Описание движения .....	12
2 Квазиустойчивые образования из частиц с электрическим дипольным моментом.....	13
2.1 Постановка задачи .....	13
2.2 Поле частиц и уравнение движения.....	14
2.3 Начальные данные .....	20
2.4 Вычислительный эксперимент .....	21
2.5 Ориентационная поляризуемость .....	22
3 Взаимодействие дипольных частиц с ионными парами.....	25
3.1 Ионные пары .....	25
3.2 Постановка задачи .....	27
3.3 Поле частиц и уравнения движения .....	27
3.4 Начальные данные .....	29
3.5 Вычислительный эксперимент .....	29
3.6 Механизм распределения зарядов в атмосфере.....	31
Заключение .....	33
Список использованных источников .....	34
Приложение А .....	36

## ВВЕДЕНИЕ

В последнее время задачи о взаимодействии электрических дипольных частиц между собой и внешним полем возникают всё чаще в разных разделах науки. В частности, теоретическое исследование свойств электрических диполей, их взаимодействия и поведения во внешнем электрическом поле привело к созданию теории диэлектриков и объяснению ряда физических эффектов [6,15]. При детальном исследовании поведения диполей в газе (где отсутствует упорядоченность как в твердом теле) возникает проблема численного решения. Причем для выяснения макро-эффектов необходимо учитывать огромное количество диполей.

Актуальность исследований вызвана несколькими причинами. Одна из них связана с тем, что многие, даже простые несимметричные двухатомные молекулы за счет ионного смещения обладают электрическим дипольным моментом, т.е. являются полярными. Самой распространенной полярной молекулой в атмосфере является трехатомная молекула воды  $H_2O$ . Изучение многих эффектов в ряде случаев связано с проявлением взаимодействия дипольных частиц. Аналитических решений у подобных задач найдено немного, в основном для небольшого числа диполей либо для их периодической структуры. Они не подходят для описания макроскопических эффектов поведения диполей в атмосфере. Это приводит к актуальной задаче создания эффективных вычислительных алгоритмов и комплексов программ для моделирования поведения огромного количества (возможно разнородных) частиц, обладающих электрическим дипольным моментом.

Объектом исследования являются частицы, обладающие электрическим дипольным моментом, а также математические модели их взаимодействия между собой, внешним полем и заряженными частицами. Математическая модель частицы представляет собой абсолютно твердое тело с заданной массой и вращательными моментами инерции.

Целью магистерской диссертационной работы является моделирование взаимодействия большого числа ( $\gg 10^3$ ) электрических дипольных частиц между собой, внешним полем и ионами.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- описание физико-математической модели дипольной частицы;
- формулировка физических законов в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих взаимодействие таких частиц между собой и внешним полем;
- тестирование и оптимизация существующего программного комплекса, моделирующего взаимодействие дипольных частиц;
- проведение вычислительных экспериментов по взаимодействию дипольных частиц между собой и внешним полем с разными начальными условиями и ограничениями;
- описание физической модели взаимодействия частиц, обладающих электрическим дипольным моментом, с ионными парами;
- оптимизация программного обеспечения для моделирования такого взаимодействия;
- проведение вычислительных экспериментов, обработка и графическое представление результатов.

В качестве метода исследования используется вычислительный эксперимент, включающий в себя следующие этапы: математическая формулировка задачи, построение численного алгоритма решения, программная реализация алгоритма, проведение расчетов, анализ и графическое представление полученных результатов.

Изначально в работе планировалось использовать программный комплекс, описанный в диссертационной работе А.В. Вяткина [4]. Этот инструмент математического моделирования позволяет рассчитывать состояния большого числа дипольных частиц при различных начальных условиях и ограничениях.

Этот программный пакет был оптимизирован и дополнен графическим представлением результатов для исследования взаимодействия дипольных частиц между собой и внешним полем, а его математический аппарат был расширен для моделирования взаимодействия дипольных частиц с ионами.

Кроме того, в работе [18] описаны геометрические конфигурации кластеров воды, которые послужили начальной основой для математического моделирования дипольных частиц. Для расчета численных характеристик последних (дипольный момент, масса и вращательные моменты) использовался программный комплекс HyperChem.

Разработан инструмент математического моделирования, позволяющий описывать взаимодействие большого числа электрических дипольных частиц с внешним полем и ионами при различных начальных условиях и ограничениях. На основе полученных моделей проведены вычислительные эксперименты с реальными физическими параметрами. Основываясь на полученных результатах, предложены гипотезы для объяснения некоторых физических явлений.

По теме магистерской диссертации имеется 6 публикаций.

1. Вяткин А.В., Корниенко В.С. Математическое моделирование процессов формирования устойчивых образований из частиц с магнитным дипольным моментом // Молодой ученый. – 2015. – №11(91). – С. 27-35.

2. Корниенко В.С. Математическое моделирование процессов формирования структур из частиц с магнитным дипольным моментом // Электронный сборник материалов международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Проспект Свободный – 2015», посвященной 70-летию Великой Победы. – 2015. – С.42-45.

3. Вяткин А.В., Корниенко В.С., Математическое моделирование взаимодействия ионов с дипольными образованиями // Молодой ученый. – 2016. -№ 11 (115). – С. 18-25.

4. Корниенко В.С. Математическое моделирование движения полярной молекулы во внешнем поле // Электронный сборник материалов международной

конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспектив Свободный – 2016» - 2016. (передана в печать)

5. V. Shaidurov , V. Kornienko , A. Vyatkin. The mathematical modeling of grouping the dipole water clusters //Short thesis for the third International Conference on Analysis and Applied Mathematics, ICAAM 2016 (transferred to the printing).

6. V. Shaidurov , V. Kornienko , A. Vyatkin. The mathematical modeling of grouping the dipole water clusters // AIP Papers (transferred to the printing).

Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на трех конференциях.

**Во введении** кратко описан объект исследования, сформулирована цель магистерской диссертационной работы, а также выделены её задачи. Обоснована актуальность поставленных вопросов исследования. Перечислены основные публикации по теме работы и дана общая характеристика магистерской диссертации.

**В первой главе** изложена математическая модель взаимодействия диполей между собой и внешним полем. Описана физическая интерпретация диполя в теории электричества. Описан способ моделирования передвижения дипольных частиц в пространстве. В конце главы кратко представлены основные подходы к численному решению обыкновенных дифференциальных уравнений на основе явных численных методов типа Рунге-Кутты.

**Вторая глава** содержит описание математической модели взаимодействия дипольных частиц во внешнем поле. В начале главы сформулирована математическая постановка задачи. Далее приведены выражения, характеризующие напряженность поля, создаваемого дипольными частицами. Выписана функция потенциальной энергии взаимодействия частицы с полем. Для описания поступательного движения каждой частицы введена сила, действующая на её центр масс. В рамках способа переориентации частиц выписано представление момента сил, под действием которого смоделировано вращательное движение. Для описания вращательного движения введены углы Эйлера, локальная подвижная



система координат, жестко закрепленная с частицей, а также матрица перехода от инерциальной системы координат к подвижной и матрица обратного перехода. В подвижной системе координат выписаны динамические уравнения Эйлера, а также дифференциальные уравнения для углов Эйлера. Начальные данные заданы в соответствии с реальными физико-химическими моделями. Выполнено масштабирование единиц измерения физических величин. Проведены вычислительные эксперименты с заданными начальными данными. Представлены некоторые гипотезы на основе полученных результатов.

В **третьей главе** приведено описание математической модели взаимодействия дипольных частиц с ионными парами во внешнем поле. Сформулирована математическая постановка задачи. Приведены физические законы, описывающие поступательное движение заряженных частиц во внешнем поле. На основе этих законов построена система обыкновенных дифференциальных уравнений. Проведены вычислительные эксперименты с начальными данными, заданными в соответствии с физико-химическими параметрами ионных пар, содержащихся в атмосфере в большом количестве. Сделаны выводы о применении полученных результатов.

В **заключении** приведено краткое резюме диссертации. Отмечено, что намеченные задачи решены и поставленная цель достигнута.

В **приложении А** приведены конфигурации и количественные характеристики, вычисленные с помощью программного комплекса HyperChem, для некоторых типов кластеров воды при температуре образования грозового облака.

# 1 Модель электрической дипольной частицы

## 1.1 Электрический диполь

Пусть  $\mathbb{R}$  – множество вещественных чисел, а  $\mathbb{R}^3$  – вещественное трехмерное пространство точек  $(x, y, z)$ , где  $x, y, z \in \mathbb{R}$  – координаты точки. Символом со стрелкой  $\vec{a}$  мы будем обозначать вектор-столбец с координатами  $(a^x, a^y, a^z)^T$ , где верхний индекс  $( )^T$  означает транспонирование. Длиной вектора  $\vec{a}$  будем называть его модуль и обозначать тем же символом без стрелки:  $a = \left( (a^x)^2 + (a^y)^2 + (a^z)^2 \right)^{1/2}$ .

Теперь опишем, что мы будем подразумевать под понятием дипольной частицы. В теории электричества [11, 15] диполем называют систему из двух точечных зарядов  $+q$  и  $-q$  противоположных знаков, находящихся на некотором

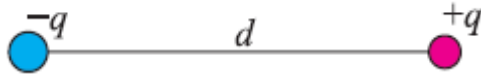


Рисунок 1 - Электрический диполь

малом расстоянии  $d$  друг от друга (рисунок 1).

Под словом «малое» следует понимать расстояние, значительно меньшее в сравнении с размерами системы, в которой рассматривается диполь. Вектор  $\vec{p}$ , направленный от отрицательного

заряда к положительному и такой что  $p = q \cdot d$ , называют электрическим дипольным моментом [13]. Все величины будем определять в системе единиц измерений СИ [8].

В качестве типичной электрической дипольной частицы рассмотрим молекулу воды  $\text{H}_2\text{O}$ . Такое моделирование корректно, поскольку известно [7], что молекула воды обладает электрическим дипольным моментом  $\vec{p}$  с модулем  $p = 6.2 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}$ . Исходя из данных о химических элементах и физико-химической модели молекулы воды [7] известно, что

масса атома кислорода:  $m(\text{O}) = 2.656 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$ ,

масса атома водорода:  $m(\text{H}) = 1.674 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$ ,

угол НОН:  $\alpha = 104^\circ 27'$ .

Основная масса атомов сосредоточена в их ядрах. Поскольку размеры ядер [7] составляют примерно  $10^{-14} \text{ м}$ , что значительно меньше межъядерного расстояния  $10^{-10} \text{ м}$ , то мы полагаем, что атомы водорода Н и кислорода О – материальные точки. В этом случае молекула воды  $\text{H}_2\text{O}$  имеет вид, схематически показанный на рисунке 2.

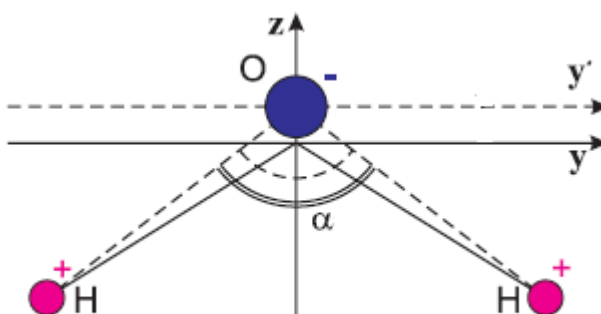


Рисунок 2 - Схематическое представление молекулы воды

## 1.2 Кластеры

Из-за теплового вращения основного из дипольных объектов, фигурирующих в описываемых физических эффектах, - отдельной молекулы воды, направление её диполя в пространстве быстро меняется. Другое дело – кластеры воды, в которые эти молекулы собираются за счет водородных связей [18]. В настоящее время проведена подробная классификация этих кластеров, в частности, определившая кластеры с наиболее выгодными энергетическими состояниями при разных температурах окружающей среды [17]. Многие из них обладают суммарным дипольным моментом [13]. В Приложении А приведены некоторые типы таких «полярных» кластеров с вычисленными для них количественными характери-

ками при температуре образования грозового облака  $-50^{\circ}\text{C}$ , или  $223\text{ K}$ . Конфигурации таких кластеров взяты из работы [18], а физические характеристики получены с помощью программы HyperChem. В дальнейшем в качестве дипольной частицы будем рассматривать один из приведенных типов кластеров. Причем при моделировании совокупности дипольных частиц набор будет состоять из различных кластеров.

### 1.3 Использование HyperChem в молекулярном моделировании

На сегодняшний день методы квантовой химии и молекулярной динамики получили широкое распространение в численном моделировании электронной и атомной структур сложных молекулярных, кристаллических систем и наноматериалов. Это стимулировало технологическое развитие соответствующего математического обеспечения. Сейчас в мире функционирует достаточно много современных вычислительных комплексов, реализующих методы квантовой химии и молекулярной динамики, однако для широкого круга пользователей наиболее доступно использование этих методов обеспечивается известной квантово-химической и молекулярно-динамической программой HyperChem.

Программа HyperChem дает возможность моделировать кластеры воды различной конфигурации путем ручного моделирования молекул воды из имеющихся в базе атомов водорода и кислорода и установления водородных связей между ними с помощью пункта *Add H&Model Build* в меню *Build*. Пункт *Geometry optimization* в меню *Compute* позволяет уточнить связи в построенной структуре. Для наблюдения молекулярной динамики кластера с полученной конфигурацией в процессе изменения температуры применяется метод Монте-Карло, который вызывается пунктом *Monte Carlo* в меню *Compute*. В качестве параметров метода можно выбрать процессы нагревания, охлаждения или постоянную температуру, а также стартовую, финальную и моделируемую температуру, шаг и

точность расчёта, как это показано на рис. 3. Изменение общей энергии на каждом шаге по времени, а также текущая температура отображаются в нижнем поле рабочего окна (рисунок 4). Эти характеристики, а также общий заряд системы, дипольный, квадрупольный и октупольный моменты можно проследить в лог-файле, включив предварительно его запись в меню *File* в пункте *Start Log*.

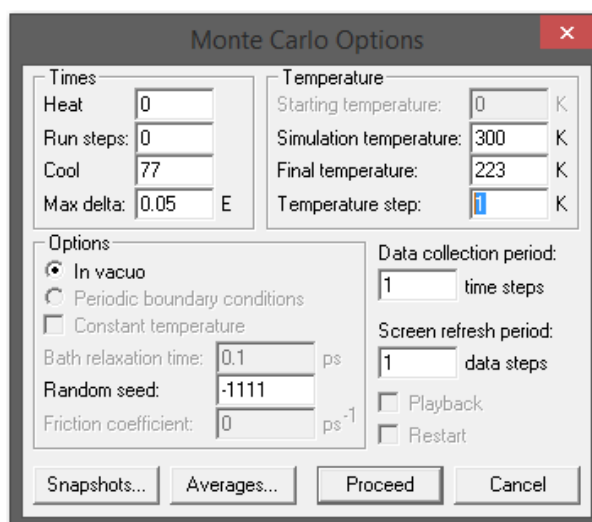


Рисунок 3 - Диалоговое окно метода *Monte Carlo*

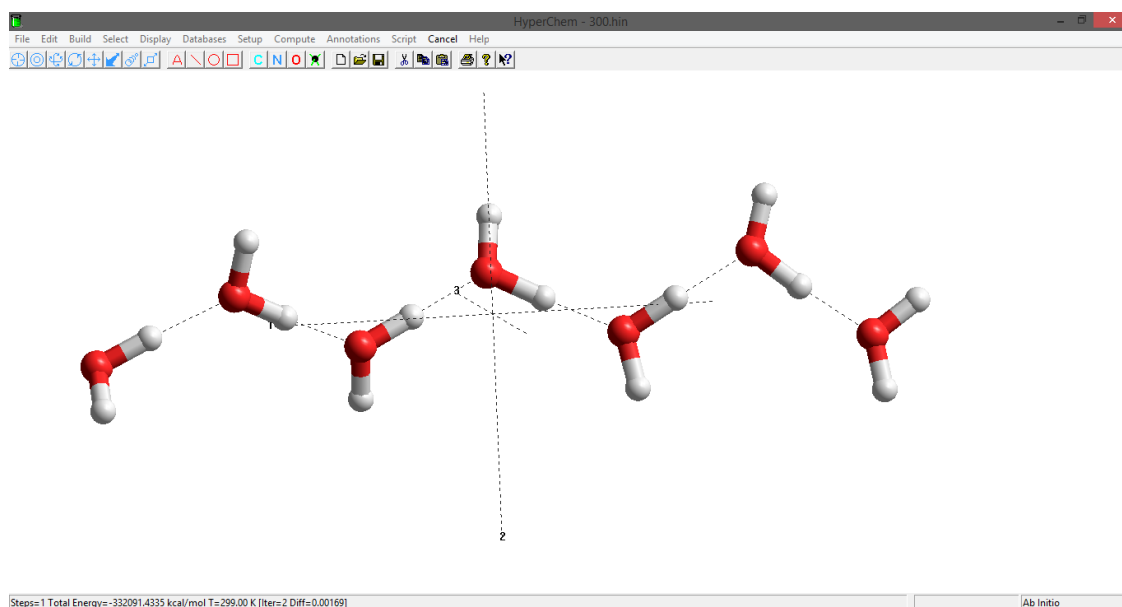


Рисунок 4 - Процесс расчетов методом *Monte Carlo*

Метод Монте-Карло применяется при решении задач молекулярной механики, полуэмпирическими или неэмпирическими (*ab initio*) методами квантовой

химии, которые можно выбрать в пунктах меню *Setup* как *Molecular Mechanics*, *Semi-empirical* и *Ab initio* соответственно. Для моделирования кластеров, описанных в Приложении А, применялся неэмпирический метод квантовой химии.

В отличие от молекулярно-механических и полуэмпирических методов, неэмпирический метод Хартри-Фока, представленный в программе HyperChem, не требует для проведения расчетов знания каких-либо эмпирических параметров, например, силы и длины отдельных связей, значений интегралов перекрывания и др. Но метод *Ab initio* требует для своих расчетов гораздо больше вычислительных ресурсов, нежели молекулярно-механические и полуэмпирические методы. Особенно это касается оптимизации геометрии или проведения молекулярно-динамических расчетов. Поэтому для оптимизации геометрии рекомендуется [17] сначала использовать молекулярную механику, а затем один из полуэмпирических методов, чтобы получить более или менее хорошее начальное приближение для последующего применения метода *Ab initio*.

#### 1.4 Описание движения

При описании движения дипольной частицы как абсолютно твердого тела введем «неподвижную», то есть инерциальную [9] декартову систему координат OXYZ. Движение каждой частицы представим в виде суперпозиции поступательного и вращательного движений. Такое разложение движения обосновано и широко используется в механике [3]. Поступательное движение частицы - это перемещение её центра масс, а вращательное – поворот вокруг центра масс. Минимально допустимой дистанцией между центрами масс частиц определим в три длины частицы вдоль линии её дипольного момента  $\vec{p}$ , поскольку при сближении частиц на меньшее расстояние необходимо учитывать возможность возникновения новой водородной связи между ними. Для описания вращательного движения  $j$  – той частице сопоставим локальную подвижную систему координат  $O_jX_jY_jZ_j$ , жестко закрепленную с частицей. Таким образом, вращение  $j$  – той

частицы отождествим с вращением  $j$  — той подвижной системы координат, которое опишем уравнением моментов [3]. С этой целью для каждой дипольной частицы введем [3] углы Эйлера  $\phi_j, \theta_j, \psi_j$  перехода от инерциальной системы координат к подвижной и используем тензор инерции  $\tilde{J}_j$   $j$  — той частицы относительно ее центра масс, который зависит от формы, размеров и распределения масс в частице. Для используемых далее объектов моделирования  $j$  — тую подвижную систему координат мы будем выбирать так, чтобы её оси являлись главными центральными осями инерции  $j$  — той дипольной частицы.

Для описания поступательного движения  $j$  — той частицы привлечем силу  $\vec{F}_j$ , действующую на её центр масс. А вращательное движение осуществляется под действием вращательного момента  $\vec{N}_j$  [14] относительно центра масс.

## 2 Квазистойчивые образования из частиц с электрическим дипольным моментом

### 2.1 Постановка задачи

Рассмотрим  $N$  дипольных частиц с массой  $m_j$ , диагональным тензором инерции  $\tilde{J}_j = \text{diag}(\tilde{J}_j^x, \tilde{J}_j^y, \tilde{J}_j^z)$  и вектором дипольного момента  $\vec{p}_j = (\tilde{p}_j^x, \tilde{p}_j^y, \tilde{p}_j^z)^T$ , заданными в подвижной системе координат, привязанной к главным центральным осям тензора инерции, где  $j=1, \dots, N$ . Требуется для  $j$  — той дипольной частицы на каждый момент времени  $t$  в инерциальной декартовой системе координат  $OXYZ$  определить следующие величины:

$\vec{r}_j = (r_j^x, r_j^y, r_j^z)^T$  — радиус-вектор центра масс дипольной частицы;

$\vec{V}_j = (V_j^x, V_j^y, V_j^z)^T$  — вектор поступательной скорости центра масс;

$\vec{\omega}_j = (\omega_j^x, \omega_j^y, \omega_j^z)^T$  — вектор угловой скорости относительно центра масс;

$p_j$  – модуль вектора  $\vec{p}_j = (p_j^x, p_j^y, p_j^z)^T$  дипольного момента;

$\varphi_j, \theta_j, \psi_j$  – углы Эйлера.

Здесь и далее символ « $\sim$ » означает, что величина задана в подвижной системе координат.

## 2.2 Поле частиц и уравнение движения

Взаимодействие дипольных частиц осуществляется посредством поля, порожденного самими диполями и внешним полем. Под полем  $\vec{\mathcal{E}}$  будем понимать вектор-функцию напряженности электрического поля, заданную во всех точках пространства  $\mathbb{R}^3$ .

### 2.2.1 Поле дипольных частиц

Известно [6], что поле, порожденное  $k$ –тым диполем, находящимся в точке  $\vec{r}_k$ , описывается следующим образом:

$$\vec{\mathcal{E}}_k^{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_k - \vec{r}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_k - \vec{r})^T}{|\vec{r}_k - \vec{r}|} \cdot \vec{p}_k \right) \frac{\vec{r}_k - \vec{r}}{|\vec{r}_k - \vec{r}|} - \vec{p}_k \right], \quad (1)$$

где  $\epsilon_0 = (36\pi)^{-1} \cdot 10^{-9}$  Кл<sup>2</sup>/ (Н · м<sup>2</sup>) – электрическая постоянная.

В силу аддитивности, полное поле, порожденное внешним полем и остальными  $N-1$  дипольными частицами и действующее на  $j$ –тую дипольную частицу, описывается формулой

$$\vec{\mathcal{E}}^{\text{dip}}(\vec{r}_j) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1, k \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_{jk}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} - \vec{p}_k \right] + \vec{\mathcal{E}}^{\text{ext}}(\vec{r}_j). \quad (2)$$



Здесь  $\vec{r}_{jk} = \vec{r}_k - \vec{r}_j$ ,  $\vec{\varepsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_j)$  – внешнее поле в точке  $\vec{r}_j$ ,  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная.

### 2.2.2 Энергия

Функция  $U(\vec{r}_j)$  потенциальной энергии  $j$ -той частицы в поле  $\vec{\varepsilon}^{\text{dip}}(\vec{r}_j)$  описывается равенством

$$U(\vec{r}_j) = -\left(\vec{\varepsilon}^{\text{dip}}(\vec{r}_j)\right)^T \cdot \vec{p}_j. \quad (3)$$

С учетом (1), (2) получим

$$U(\vec{r}_j) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{k=1, k \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_{jk}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_j \right) - \vec{p}_k^T \vec{p}_j \right] - \left(\vec{\varepsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_j)\right)^T \vec{p}_j. \quad (4)$$

Значение кинетической энергии  $W_{\text{tr}}^{\text{full}}$  поступательного движения системы частиц определяется формулой

$$W_{\text{tr}}^{\text{full}} = \sum_{j=1}^N m_j |\vec{V}_j|^2 / 2.$$

А кинетическая энергия  $W_{\text{rot}}^{\text{full}}$  вращательного движения системы частиц выражается равенством

$$W_{\text{rot}}^{\text{full}} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left( \tilde{J}_j^x (w_j^x)^2 + \tilde{J}_j^y (w_j^y)^2 + \tilde{J}_j^z (w_j^z)^2 \right).$$

Полная кинетическая энергия  $W^{\text{full}}$  системы частиц складывается из двух составляющих:

$$W^{\text{full}} = W_{\text{tr}}^{\text{full}} + W_{\text{rot}}^{\text{full}}.$$

### 2.2.3 Уравнение поступательного движения

Поступательное движение частицы определяется движением её центра масс. Сила  $\vec{F}_j = (F_j^x, F_j^y, F_j^z)^T$ , действующая на центр масс  $j$ -той частицы в потенциальном поле [17], представима в виде

$$\vec{F}_j = \vec{F}(\vec{r}_j) = -\nabla U(\vec{r}_j), \quad (5)$$

где символ  $\nabla$  означает оператор градиента  $\nabla f = (\partial f / \partial x, \partial f / \partial y, \partial f / \partial z)^T$ . После вычисления градиента функции потенциальной энергии  $U(\vec{r}_j)$  с учетом (4),(5) получим

$$\begin{aligned} \vec{F}_j = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1, k \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_{jk}|^4} & \left[ 15 \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} - 3 \left( \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \vec{p}_j + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_j \right) \vec{p}_k + \left( (\vec{p}_k)^T \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} \right) \right] + \nabla \left( \left( \vec{\epsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_j) \right)^T \cdot \vec{p}_j \right). \end{aligned} \quad (6)$$

В качестве дифференциального уравнения, описывающего поступательное движение  $j$ -той дипольной частицы, используем второй закон Ньютона:

$$m_j \frac{d^2 r_j^q}{dt^2} = F_j^q, \quad q = x, y, z; \quad j = 1, \dots, N. \quad (7)$$

Уравнение (7) сведем к системе обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка посредством использования компонент вектора скорости:

$$\begin{cases} \frac{dr_j^q}{dt} = V_j^q, \\ \frac{dV_j^q}{dt} = \frac{1}{m_j} F_j^q. \end{cases} \quad q = x, y, z; \quad j = 1, \dots, N. \quad (8)$$

После проведения несложных преобразований с учетом (7)-(8) для  $j$ -того диполя получим следующую систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}_j}{dt} = \vec{V}_j, \\ \frac{d\vec{r}_j}{dt} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 m_j} \sum_{k=1, k \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_{jk}|^4} \left[ 15 \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} - \right. \\ \left. - 3 \left( \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \vec{p}_j + \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_j \right) \vec{p}_k + \left( (\vec{p}_k)^T \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} \right) \right] + \frac{1}{m_j} \nabla \left( \left( \vec{\epsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_j) \right)^T \cdot \vec{p}_j \right). \end{array} \right. \quad (9)$$

Таким образом, система, состоящая из  $6N$  обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка полностью описывает поступательное движение дипольных частиц.

## 2.2.4 Уравнения вращательного движения

Вращательное движение  $j$  – той частицы описывается вращением частицы вокруг её центра масс [14] под действием момента сил  $\vec{N}(r_j)$ , который определяется равенством

$$\vec{N}(r_j) = \vec{p}_j \times \vec{\epsilon}^{\text{full}}(r_j), \quad (10)$$

где символ  $\times$  означает векторное произведение.

С учетом (2) выражение для момента  $\vec{N}(r_j)$  перепишем в виде

$$\vec{N}(r_j) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=1, k \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_{jk}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{jk})^T}{|\vec{r}_{jk}|} \cdot \vec{p}_k \right) \left[ \vec{p}_j \times \frac{\vec{r}_{jk}}{|\vec{r}_{jk}|} \right] - \left[ \vec{p}_j \times \vec{p}_k \right] \right] + \left[ \vec{p}_j \times \vec{\epsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_j) \right]. \quad (11)$$

Для описания вращательного движения  $j$  – той частицы введем подвижную систему координат  $O_j X_j Y_j Z_j$ , жестко закрепленную с ней так, что её оси являются главными центральными осями инерции этой частицы. Переход от инерциальной системы координат к подвижной осуществим с помощью углов Эйлера  $\phi_j, \theta_j, \psi_j$ , интерпретация [3] которых изображена на рисунке 5

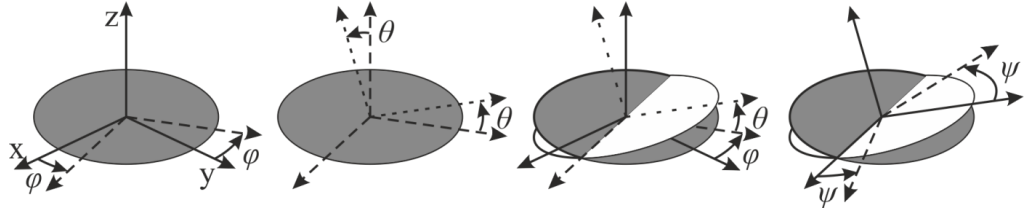


Рисунок 5 - Углы Эйлера

Углы  $\phi_j, \theta_j, \psi_j$  называют углами прецессии, нутации и собственного вращения соответственно. Исходя из определения углов Эйлера, в [10] построена матрица  $A_j$  перехода от подвижной системы координат  $O_j X_j Y_j Z_j$  к неподвижной  $OXYZ$ :

$$A_j = \begin{pmatrix} \cos \phi_j \cdot \cos \psi_j - & -\cos \phi_j \cdot \sin \psi_j - & \sin \phi_j \cdot \sin \theta_j \\ -\sin \phi_j \cdot \cos \theta_j \cdot \sin \psi_j & -\sin \phi_j \cdot \cos \theta_j \cdot \cos \psi_j & \\ \sin \phi_j \cdot \cos \psi_j + & -\sin \phi_j \cdot \sin \psi_j + & -\cos \phi_j \cdot \sin \theta_j \\ + \cos \phi_j \cdot \cos \theta_j \cdot \sin \psi_j & + \cos \phi_j \cdot \cos \theta_j \cdot \cos \psi_j & \\ \sin \theta_j \cdot \sin \psi_j & \sin \theta_j \cdot \cos \psi_j & \cos \theta_j \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Аналогичным способом получим матрицу  $B_j$  перехода от неподвижной системы координат  $OXYZ$  к подвижной:

$$B_j = (A_j)^T. \quad (13)$$

Вращательное движение  $j$ -той дипольной частицы опишем дифференциальным уравнением моментов, которое в подвижной системе координат  $O_j X_j Y_j Z_j$  имеет вид

$$\frac{d\vec{L}_j}{dt} + \vec{\omega}_j \times \vec{L}_j = \vec{N}_j. \quad (14)$$

Здесь  $\vec{L}_j$  – момент импульса  $j$ -той дипольной частицы, который определим в виде:

$$\vec{L}_j = \tilde{J}_j \vec{\omega}_j. \quad (15)$$

Поскольку каждая  $j$ -тая дипольной частица жестко закреплена с соответствующей подвижной системой координат  $O_j X_j Y_j Z_j$ , то элементы тензора инерции не меняются со временем:

$$\frac{d\tilde{J}_j^q}{dt} = 0, \quad \forall q = x, y, z. \quad (16)$$

Учитывая (16), в скалярном виде имеем

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{\omega}_j^x}{dt} + \tilde{\omega}_j^y \tilde{\omega}_j^z \frac{\tilde{J}_j^z - \tilde{J}_j^y}{\tilde{J}_j^x} = \frac{\tilde{N}^x(r_j)}{\tilde{J}_j^x}, \\ \frac{d\tilde{\omega}_j^y}{dt} + \tilde{\omega}_j^x \tilde{\omega}_j^z \frac{\tilde{J}_j^x - \tilde{J}_j^z}{\tilde{J}_j^y} = \frac{\tilde{N}^y(r_j)}{\tilde{J}_j^y}, \\ \frac{d\tilde{\omega}_j^z}{dt} + \tilde{\omega}_j^x \tilde{\omega}_j^y \frac{\tilde{J}_j^y - \tilde{J}_j^x}{\tilde{J}_j^z} = \frac{\tilde{N}^z(r_j)}{\tilde{J}_j^z}. \end{cases} \quad \forall j = 1, \dots, N. \quad (17)$$

Уравнения (17) называют динамическими уравнениями Эйлера, характеризующими скорость изменения угловой скорости  $\vec{\tilde{\omega}}_j$ , заданной в локальной подвижной системе координат  $O_j X_j Y_j Z_j$ . Определим изменение во времени самой подвижной системы координат. Для этого выпишем уравнения, характеризующие связь между производной по времени от углов Эйлера  $\varphi_j, \theta_j, \psi_j$  и угловой скоростью  $\vec{\tilde{\omega}}_j$  [10]:

$$\begin{cases} d\varphi_j/dt = (\tilde{\omega}_j^x \sin \psi_j + \tilde{\omega}_j^y \cos \psi_j) / \sin \theta_j, \\ d\psi_j/dt = \tilde{\omega}_j^z - \cot \theta_j (\tilde{\omega}_j^x \sin \psi_j + \tilde{\omega}_j^y \cos \psi_j), \\ d\theta_j/dt = \tilde{\omega}_j^x \cos \psi_j - \tilde{\omega}_j^y \sin \psi_j. \end{cases} \quad j = 1, \dots, N. \quad (18)$$

Интегрирование системы (17)-(18), содержащей в себе  $6N$  скалярных уравнений в общем случае может быть выполнено только численно.

Таким образом, системы уравнений (9), (17)-(18) полностью описывают движение  $j$ -того диполя, включая собственное вращение вокруг его центра масс.

## 2.3 Начальные данные

Пусть вычислительная область – сфера диаметра  $D_{\text{dom}}$ . В качестве диполей рассмотрим кластеры воды, описанные в разделе 1.2. Для дипольных частиц с приемлемой для нас степенью точности известны их физические параметры, приведенные в Приложении А.

На начальный момент времени  $t = t_0$  поступательную и угловую скорости каждой частицы определим равными нулю

$$V_j^x = V_j^y = V_j^z = 0 \text{ м/с}, \quad \omega_j^x = \omega_j^y = \omega_j^z = 0 \text{ с}^{-1}. \quad (19)$$

Углы Эйлера  $\varphi_j, \theta_j, \psi_j$  и координаты радиус-вектора  $\vec{r}_j$  будем задавать случайным образом с учетом следующих ограничений:

$$\varphi_j \in [0, 2\pi], \quad \theta_j \in [0, \pi], \quad \psi_j \in [0, 2\pi], \quad |\vec{r}_j| \leq D_{\text{dom}}/2. \quad (20)$$

Минимально допустимое расстояние  $d_{\text{min}}$  между центрами масс дипольных частиц определим как три минимальных длины молекулы воды вдоль линии её дипольного момента:

$$d_{\text{min}} = 1.773 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Для традиционных языков программирования максимальная точность представления вещественного числа в компьютере составляет 15 десятичных значащих цифр. Поэтому для корректных вычислений желательно, чтобы отношение максимального числа к минимальному по модулю числу не превышало  $10^{15}$ . Исходя из этого диаметр  $D_{\text{dom}}$  вычислительной области зададим как  $D_{\text{dom}} = 10^{-7} \text{ м}$ .

Проведем масштабирование единиц измерения с параметрами, указанными в [4]:

$$\frac{\text{кг}}{10^{29}} = \text{кг}^*, \quad \frac{\text{м}}{10^{10}} = \text{м}^*, \quad \frac{\text{с}}{10^{11}} = \text{с}^*, \quad \frac{\text{А}}{10^{12}} = \text{А}^*. \quad (21)$$

Тогда, с учетом (21) вместо (19), получим следующие значения параметров для частиц с дипольным моментом:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \frac{\text{кг}^* \cdot (\text{м}^*)^3}{(\text{А}^*)^2 \cdot (\text{с}^*)^4}; \quad V_j^x = V_j^y = V_j^z = 0 \text{ м}^*/\text{с}^*; \quad \omega_j^x = \omega_j^y = \omega_j^z = 0 (\text{с}^*)^{-1}. \quad (22)$$

и ограничения

$$\varphi_j \in [0, 2\pi], \quad \theta_j \in [0, \pi], \quad \psi_j \in [0, 2\pi], \quad |\vec{r}_{jk}| \geq 1.773 \text{ м}^*, \quad |\vec{r}_j| \leq 500 \text{ м}^*. \quad (23)$$

Масштабированные начальные данные для различных типов кластеров описаны в Приложении А.

Внешнее электрическое поле  $\vec{\mathcal{E}}^{\text{ext}} = (0, 0, -\mathcal{E}^{\text{ext}})^T$ , направленное противоположно оси OZ, будем считать равным внешнему электрическому полю Земли [12]:

$$\mathcal{E}^{\text{ext}} = 130 \text{ В/м}. \quad (24)$$

Для численного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений (9), (17) - (18), использовались различные методы из семейства явных численных методов типа Рунге-Кутты [2] с контролем точности и устойчивости. Наиболее точные расчеты за меньшее время вычислений получены с помощью метода Мерсона [5] пятого порядка точности.

## 2.4 Вычислительный эксперимент

Вычислительный эксперимент состоит в следующем. Расположим дипольные частицы в полости цилиндра диаметром  $5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$  и осью, параллельной оси OZ. Начальные данные будем задавать с учетом (22) - (24) и данных, описанных в Приложении А. Направление дипольных моментов и положение заряженных частиц зададим случайным образом в пределах вычислительной области.

Под действием внешнего электрического поля дипольные частицы упорядочиваются вдоль линий напряженности внешнего поля, образуя таким образом дипольную «косичку», как это показано на рисунке 6.

Из рисунка видно, что образование из частиц с электрическим дипольным моментом порождает собственное электрическое поле, на порядок превышающее внешнее поле.

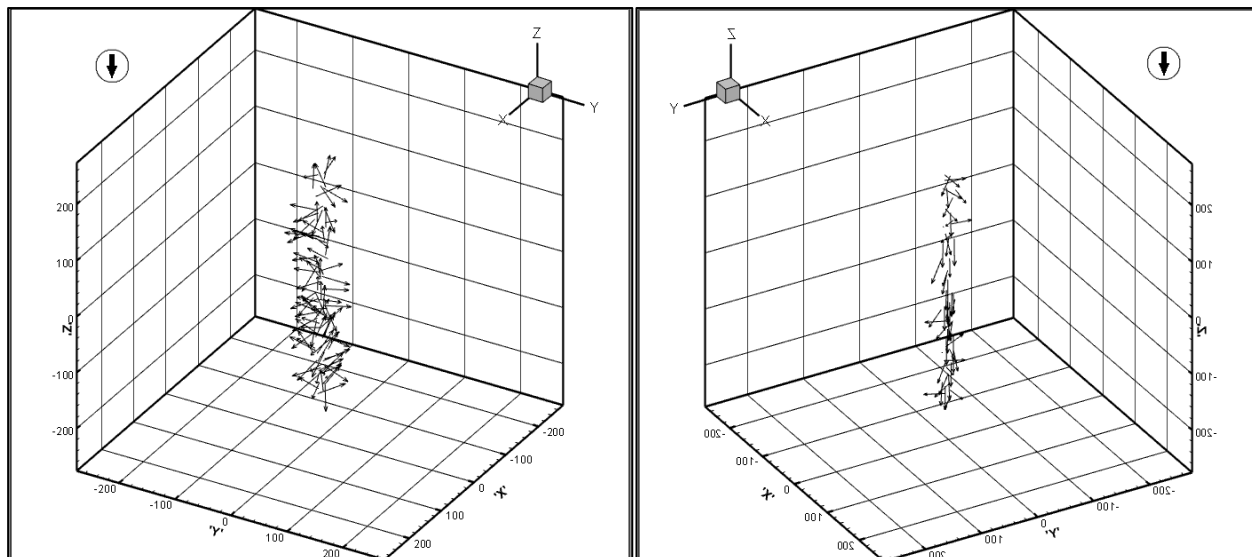


Рисунок 6 - Слева – начальное положение диполей, справа – установившееся

## 2.5 Ориентационная поляризуемость

Поясним смысл динамики и результата вычислительного эксперимента. В отсутствие электрического поля с учетом теплового вращения направления диполей случайны, так что суммарный момент в единице объема приблизительно равен нулю. Но если приложить электрическое поле  $\vec{E}$ , то проявятся два эффекта. Во-первых, индуцируется дополнительный дипольный момент из-за сил, раздельно действующих на электроны и ядра атомов; эта часть приводит к электронной поляризуемости, определение которой мы дадим ниже. При очень точном исследовании этот эффект, конечно, нужно учитывать, но мы пока пренебрежем им. Во-вторых, электрическое поле стремится удерживать диполи в некотором направлении, создавая результирующий момент в единице объема. Это свойство носит название ориентационной (дипольной) поляризуемости.



В постоянном или достаточно медленно меняющемся во времени внешнем электрическом поле при достаточно малой величине напряженности этого поля, вектор поляризации  $\vec{P}$ , как правило, линейно зависит от вектора напряженности поля  $\vec{\mathcal{E}}$  [6]:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{\mathcal{E}}, \quad (25)$$

где  $\chi$  - диэлектрическая восприимчивость, зависящая от химического состава, концентрации, структуры (в том числе от агрегатного состояния) среды, температуры, механических напряжений и т.д.

Поляризуемость  $\alpha$  атома [6] определяется через локальное электрическое поле:

$$\vec{p} = \varepsilon_0 \alpha \vec{\mathcal{E}}^{\text{loc}}, \quad (26)$$

где  $\vec{p}$  – дипольный момент атома. Заметим, что величина  $\alpha$  является характеристикой атома (или иона), в то время как диэлектрическая восприимчивость будет зависеть также от того, как атомы расположены в кристалле.

В полной поляризуемости  $\alpha$  можно выделить три части: электронную, ионную и ориентационную (дипольную). Рисунок 7 иллюстрирует механизм этих видов поляризуемости.

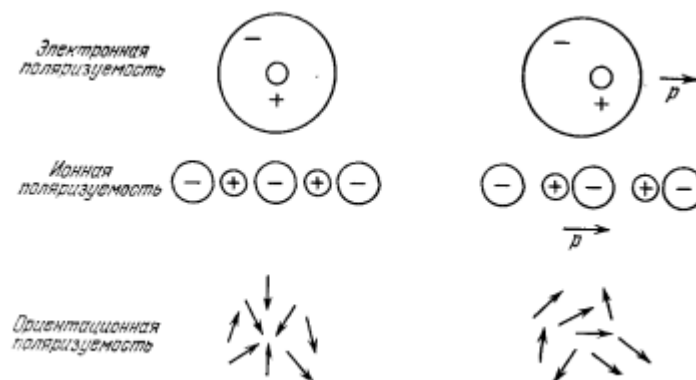


Рисунок 7 - Схематическое изображение трех основных типов вкладов в поляризуемость. Слева – ситуация в отсутствие внешнего поля  $\vec{\mathcal{E}}$ , справа – при включении поля  $\vec{\mathcal{E}}$ ;  $\vec{p}$  – вектор дипольного момента

Электронная поляризуемость обусловлена смещением электронной оболочки атома относительно ядра. Ионная поляризуемость вызвана смещением заряженных ионов по отношению к другим ионами. Ориентационная (дипольная) поляризуемость  $\alpha^{\text{dip}}$  возникает, когда вещество состоит из молекул, обладающих постоянными электрическими дипольными моментами, которые могут более-менее свободно изменять свою ориентацию во внешнем электрическом поле.

Тенденции постоянных дипольных моментов ориентироваться вдоль направления электрического поля противостоит тепловое движение. Потенциальную энергию  $U$  молекулы с постоянным моментом  $\vec{p}$  в поле  $\vec{\varepsilon}$  также можно выразить через скалярное произведение

$$U = -(\vec{p} \cdot \vec{\varepsilon}) = -p \cdot \varepsilon \cdot \cos \theta, \quad (27)$$

где  $\theta$  – угол между вектором момента и направлением поля. Величина поляризации  $\vec{P}$  определяется в этом случае соотношением [6]:

$$P = Np \langle \cos \theta \rangle. \quad (28)$$

Здесь  $N$  – концентрация (число молекул в единице объема),  $\langle \cos \theta \rangle$  – среднее значение  $\cos \theta$ , взятое по пространственному распределению дипольных моментов в состоянии теплового равновесия.

Согласно [6], определим функцию Ланжевена  $L(x)$

$$\langle \cos \theta \rangle = \text{cth} x - 1/x \equiv L(x). \quad (29)$$

График этой функции приведен на рисунке 8, из которого ясно видно, что при  $p\varepsilon \gg kT$ , где  $k$  – постоянная Больцмана, она демонстрирует насыщение.

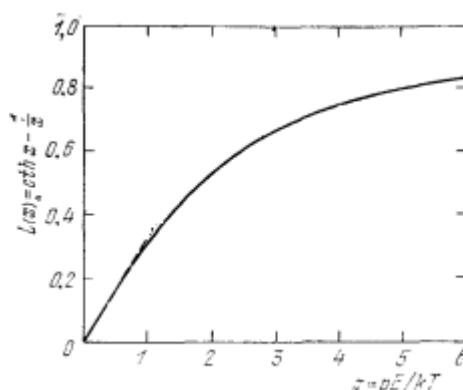


Рисунок 8 - График функции Ланжевена  $L(x)$ , где  $x = p\varepsilon/kT$ . Величина поляризации, составляющая 80% от значения, отвечающего насыщению, соответствует  $p\varepsilon/kT = 5$

При температуре формирования грозового облака  $T = 223 \text{ K}$  дипольные моменты имеют порядок величины  $10^{-29} \text{ Кл} \cdot \text{м}$ ;  $kT \approx 10^{-21} \text{ Дж}$ , а величина внешнего поля электрического поля Земли порядка  $10^2 \text{ В/м}$  и, следовательно,  $x = p\varepsilon/kT \ll 1$ . В этом случае имеем:

$$\text{cth} x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots; \quad L(x) \approx \frac{x}{3} = \frac{p\varepsilon}{3kT}, \quad (30)$$

а поляризация

$$P = Np \langle \cos \theta \rangle = Np^2 \varepsilon / 3kT. \quad (31)$$

Исходя из (31), ориентационная поляризуемость (т.е. средняя поляризация на одну молекулу):

$$\alpha^{\text{dip}} = p^2 / 3kT. \quad (32)$$

### 3 Взаимодействие дипольных частиц с ионными парами

#### 3.1 Ионные пары

Атмосфера содержит заряженные частицы – ионы и благодаря их присутствию не является идеальным изолятором, а обладает способностью проводить электричество. Ионы образуются в атмосфере под воздействием ионизаторов, сообщаящих атомам энергию, достаточную для удаления электрона из оболочки

атома. Отделившийся электрон почти мгновенно присоединяется к другому атому. В результате первый атом из нейтрального превращается в положительно заряженный, а второй приобретает отрицательный заряд. Такие ионы существуют недолго, к ним присоединяются молекулы окружающего воздуха, образуя так называемые легкие ионы. Легкие ионы присоединяются к аэрозолям, отдают им свой заряд и образуют более крупные тяжелые ионы.

Ионизаторами атмосферы являются: ультрафиолетовое излучение Солнца, космическое излучение, излучение радиоактивных веществ, содержащихся в земной коре и в атмосфере. Ультрафиолетовые лучи не оказывают существенного ионизирующего воздействия на нижние слои атмосферы – их влияние является основным в верхних слоях атмосферы.

Например, при ультрафиолетовой ионизации молекулы воды получается два иона:



Ионизация атмосферы характеризуется концентрацией ионов (содержанием их в  $1 \text{ см}^3$ ); от концентрации и подвижности легких ионов зависит электропроводность атмосферы. С высотой концентрация ионов увеличивается. На высоте 3–4 км она составляет до 1000 пар ионов, максимальные величины достигает на высоте 100–250 км.

Рассмотрим в качестве заряженных частиц пару  $\text{H}^+$  и  $\text{OH}^-$  со следующими параметрами [7]:

$$\begin{aligned} \text{масса положительно заряженного иона: } m_{\text{H}^+} &= 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ кг,} \\ \text{масса отрицательно заряженного иона: } m_{\text{OH}^-} &= 28.24 \cdot 10^{-27} \text{ кг,} \\ \text{численное значение заряда иона } \text{H}^+ : q_{\text{H}^+} &= 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл,} \\ \text{численное значение заряда иона } \text{OH}^- : q_{\text{OH}^-} &= -1.602 \cdot 10^{-19} \text{ Кл.} \end{aligned} \quad (34)$$

### 3.2 Постановка задачи

Рассмотрим  $N$  дипольных частиц с массой  $m_j$ , диагональным тензором инерции  $\tilde{J}_j = \text{diag}(\tilde{J}_j^x, \tilde{J}_j^y, \tilde{J}_j^z)$  и вектором дипольного момента  $\vec{\tilde{p}}_j = (\tilde{p}_j^x, \tilde{p}_j^y, \tilde{p}_j^z)^T$ , заданными в подвижной системе координат, привязанной к главным центральным осям тензора инерции, и  $M$  заряженных частиц с массой  $m_k^{\text{ion}}$  и зарядом  $q_k$ ,  $k = 1, \dots, M$ . Для каждой  $j$ -той дипольной частицы на каждый момент времени  $t$  в инерциальной декартовой системе координат  $OXYZ$  следует определить следующие величины:

$\vec{r}_j = (r_j^x, r_j^y, r_j^z)^T$  – радиус-вектор центра масс дипольной частицы;

$\vec{V}_j = (V_j^x, V_j^y, V_j^z)^T$  – вектор поступательной скорости центра масс;

$\vec{\omega}_j = (\omega_j^x, \omega_j^y, \omega_j^z)^T$  – вектор угловой скорости относительно центра масс;

$p_j$  – модуль вектора  $\vec{p}_j = (p_j^x, p_j^y, p_j^z)^T$  дипольного момента;

$\varphi_j, \theta_j, \psi_j$  – углы Эйлера.

Для  $k$ -той же заряженной частицы на момент времени  $t$  необходимо найти:

$\vec{r}_k^{\text{ion}} = (r_k^x, r_k^y, r_k^z)^T$  – радиус-вектор центра масс заряженной частицы;

$\vec{V}_k^{\text{ion}} = (V_k^x, V_k^y, V_k^z)^T$  – вектор поступательной скорости центра масс.

### 3.3 Поле частиц и уравнения движения

Уравнения движения, описывающие перемещение дипольных частиц, представлены в главе 2. А именно, для описания поступательного движения дипольных частиц будем использовать систему уравнений (9), а для описания вращательного – системы (17), (18).

В свою очередь, взаимодействие заряженных частиц осуществляется посредством поля, порожденного диполями, ионами и внешним полем. Напряженность поля, созданного дипольными частицами и действующего на  $k$ -тую заряженную частицу можно получить из формулы (2):

$$\vec{\varepsilon}^{\text{dip}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{kj}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{kj})^T}{|\vec{r}_{kj}|} \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{kj}}{|\vec{r}_{kj}|} - \vec{p}_j \right], \quad (35)$$

где  $\varepsilon_0$  – электрическая постоянная,  $\vec{r}_{kj} = \vec{r}_j - \vec{r}_k^{\text{ion}}$ .

Поле, порожденное ионами, описывается [1] формулой

$$\vec{\varepsilon}^{\text{ion}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j=1, j \neq k}^M \frac{q_j}{|\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}|^3} (\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}). \quad (36)$$

Согласно принципу суперпозиции и с учетом (35), (36), получаем, что полное поле, действующее на  $k$ -тую заряженную частицу равно

$$\begin{aligned} \vec{\varepsilon}^{\text{full}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) &= \vec{\varepsilon}^{\text{dip}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) + \vec{\varepsilon}^{\text{ion}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) + \vec{\varepsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{kj}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{kj})^T}{|\vec{r}_{kj}|} \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{kj}}{|\vec{r}_{kj}|} - \vec{p}_j \right] + \\ &+ \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j=1, j \neq k}^M \frac{q_j}{|\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}|^3} (\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}) + \vec{\varepsilon}^{\text{ext}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}), \quad k=1, \dots, M; \quad j=1, \dots, N. \end{aligned} \quad (37)$$

Для нахождения силы, действующей на центр масс заряженной частицы, воспользуемся законом Кулона [1]:

$$\vec{F}^{\text{ion}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}) = q_k \vec{\varepsilon}^{\text{full}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}). \quad (38)$$

Пользуясь теми же рассуждениями, что и для (9), с помощью (7) - (8) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, состоящую из  $6M$  скалярных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}_k^{\text{ion}}}{dt} = \vec{V}_k^{\text{ion}}, \\ \frac{d\vec{V}_k^{\text{ion}}}{dt} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 m_k^{\text{ion}}} \sum_{j=1}^N \frac{q_k}{|\vec{r}_{kj}|^3} \left[ 3 \left( \frac{(\vec{r}_{kj})^T}{|\vec{r}_{kj}|} \cdot \vec{p}_j \right) \frac{\vec{r}_{kj}}{|\vec{r}_{kj}|} - \vec{p}_j \right] + \\ + \frac{q_k}{4\pi\epsilon_0 m_k^{\text{ion}}} \sum_{j=1, j \neq k}^M \frac{q_j}{|\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}|^3} (\vec{r}_k^{\text{ion}} - \vec{r}_j^{\text{ion}}) + \frac{q_k}{m_k^{\text{ion}}} \vec{\mathcal{E}}^{\text{ext}}(\vec{r}_k^{\text{ion}}). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} k=1, \dots, M; \\ j=1, \dots, N. \end{array} \quad (39)$$

### 3.4 Начальные данные

В качестве вычислительной области также рассмотрим сферу диаметра  $D_{\text{dom}}$ . Для дипольных частиц в качестве начальных данных будем использовать (22) - (24) и данные, приведенные в Приложении А, а для ионов - их физические характеристики (34). Поступательные скорости каждой заряженной частицы на начальный момент времени  $t = t_0$  определим равными нулю

$$(V_j^x)^{\text{ion}} = (V_j^y)^{\text{ion}} = (V_j^z)^{\text{ion}} = 0 \text{ м/с}. \quad (40)$$

С учетом параметров масштабирования (21) для заряженных частиц получим:

$$\begin{aligned} \text{масса положительно заряженного иона: } m_{\text{H}^+} &= 167 \text{ кг}^*, \\ \text{масса отрицательно заряженного иона: } m_{\text{OH}^-} &= 2824 \text{ кг}^*, \\ \text{численное значение заряда иона } \text{H}^+ : q_{\text{H}^+} &= 16020 \text{ Кл}^*, \\ \text{численное значение заряда иона } \text{OH}^- : q_{\text{OH}^-} &= -16020 \text{ Кл}^*. \end{aligned} \quad (41)$$

### 3.5 Вычислительный эксперимент

Вычислительный эксперимент состоит в следующем. Расположим дипольные частицы в полости цилиндра диаметра  $D_{\text{dom}} = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$  и осью, параллельной

оси  $OZ$ . Начальные данные зададим с учетом (22) - (24), (41). Направление дипольных моментов и положение заряженных частиц определим случайным образом в пределах вычислительной области. Внешнее электрическое поле  $\vec{\varepsilon}^{\text{ext}} = (0, 0, -\varepsilon^{\text{ext}})^T$ , направленное противоположно оси  $OZ$ , будем считать равным внешнему электрическому полю Земли (24) [12]:

Под действием внешнего электрического поля дипольные частицы упорядочиваются вдоль линий напряженности внешнего поля, а заряженные частицы «облепляют» образованную таким образом дипольную «косичку», как показано на рисунке 9.

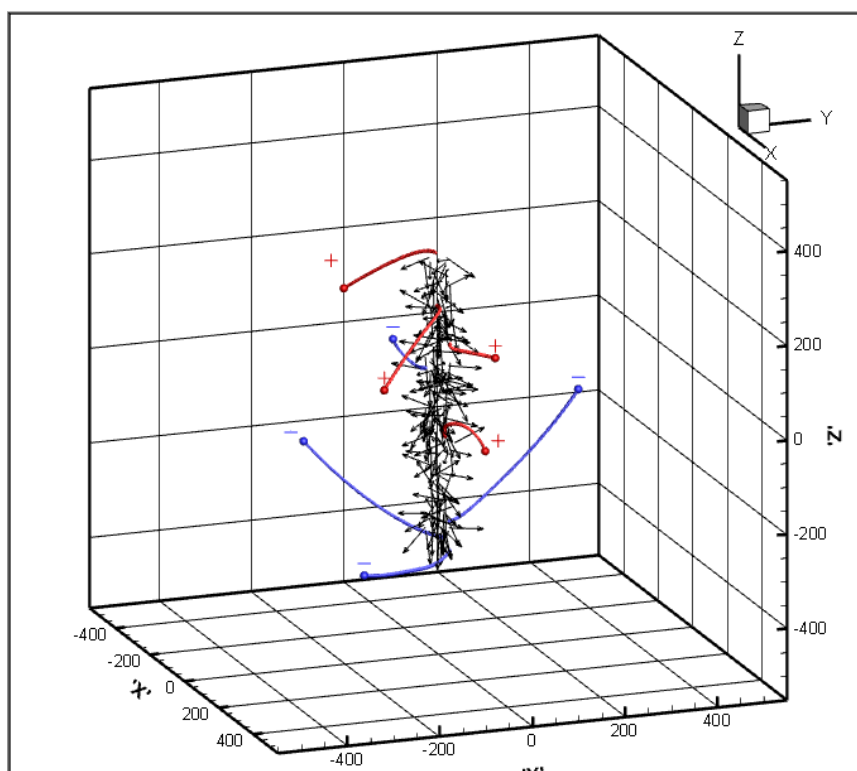


Рисунок 9 – Траектории движения заряженных частиц. “+” – положительно заряженные, “-” – отрицательно

При численном моделировании было зафиксировано устойчивое во времени образование из частиц с электрическим дипольным моментом, которое создало собственное электрическое поле, на порядок превышающее внешнее.



Ближе к верхнему отрицательному полюсу такого образования скапливается положительный заряд, а ближе к нижнему положительному – отрицательный, усиливая созданное диполями поле.

### **3.6 Механизм распределения зарядов в атмосфере**

Полученный с помощью вычислительного эксперимента эффект может объяснить образование в атмосфере так называемого «тёмного лидера», предшествующего обратной вспышке молнии. Образование молнии начинается со светящегося комка, называемого «ступенчатым лидером». Он не такой яркий как сама вспышка молнии. Он проходит всего около 50 м и останавливается. Следует пауза около 50 мксек, а затем происходит следующий шаг. За ним снова пауза, а после новый шаг и т. д. Так, шаг за шагом, пятно движется к Земле, по «ступеням». В лидере имеются отрицательные заряды из тучи; весь столб полон отрицательного электричества. Кроме того, воздух начинает ионизоваться быстро движущимися зарядами, образующими лидер, так что воздух вдоль отмеченного пути становится проводящим. В момент, когда лидер коснется грунта, получается проводящая «провода», которая тянется до самой тучи и полна отрицательного электричества. Теперь электроны соскакивают наземь, оставив позади себя положительный заряд, который притягивает новые отрицательные заряды из высших частей лидера; которые также уходят вниз и т. д. В конце концов весь отрицательный заряд этой части тучи быстро сбежит по этому каналу вниз. И этот основной разряд — самая яркая часть разряда — называется обратной вспышкой. Она и вызывает яркое свечение и выделение тепла, которое, приводя к быстрому расширению воздуха, производит громовой удар.

Спустя небольшой промежуток времени, может быть, в несколько сотых секунды, когда обратная молния уже исчезла, вниз пикирует новый лидер. Но на этот раз уже без пауз, без остановок. Теперь его именуют «темным лидером», и

весь путь сверху донизу он проходит одним броском. Он спускается в точности по прежнему следу, потому что этот путь оказался самым легким из всех путей. Новый лидер полон отрицательного электричества. И в мгновение, когда он касается почвы, появляется обратная молния, проходящая по тому же пути [15].

Таким образом, в момент образования в атмосфере «темного лидера» в уже созданном плазменном канале в огромном количестве содержатся дипольные частицы, под воздействием внешнего поля выстраивающиеся в образования по типу «косичек». Распределение ионов вдоль созданной «косички» усиливает созданное диполями поле, образуя разряд, проходящий по плазменному каналу.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

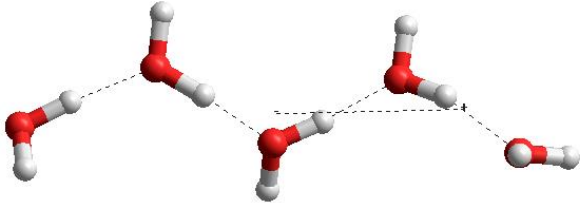
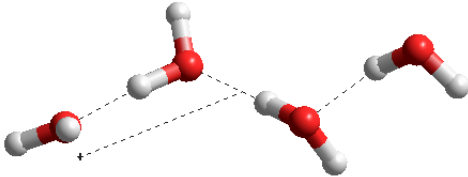
В работе предложена физико-математическая модель, описывающая взаимодействие электрических дипольных частиц со слабым внешним полем. Проведена верификация вычислительного алгоритма этой модели для образований из электрических диполей. С помощью комплекса программ HyperChem проведены расчеты дипольных моментов и тензоров инерций кластеров воды при температуре верхней части грозового облака. Эти данные использованы для вычислительного эксперимента по взаимодействию дипольных кластеров воды со слабым внешним электрическим полем Земли и ионными парами. В итоге, вычислительные эксперименты продемонстрировали нарастающую ориентацию дипольных частиц сначала относительно внешнего электрического поля, а затем вдоль созданного ими поля, перестраиваясь в образования по типу «косичек». Выбор исходного расположения дипольных частиц в объеме некоторого цилиндра характеризует совокупность диполей как некоторый «электрический домен» по аналогии с хорошо известными магнитными доменами. Это же исходное расположение диполей влияет на быструю ориентационную координацию ввиду незначительного деполяризующего поля складывающегося образования. Проведен также вычислительный эксперимент, демонстрирующий усиление электрического поля исходного дипольного образования за счет взаимодействия с ионными парами.

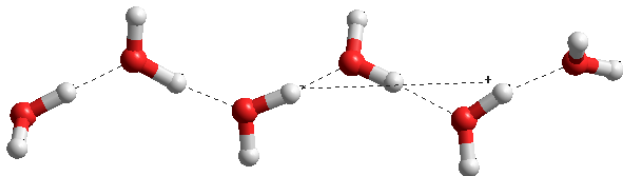
## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

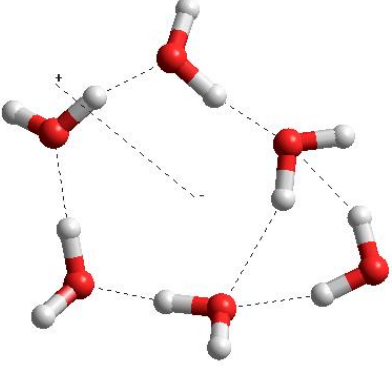
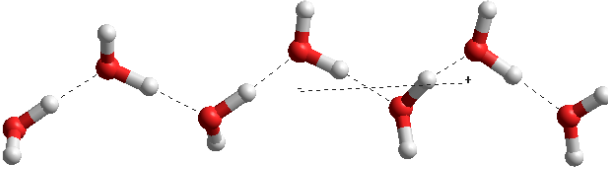
1. Арцимович, Л.А. Движение заряженных частиц в электрических и магнитных полях: Учебное пособие / Л.А. Арцимович, С.Ю. Лукьянов – Москва: Наука, 1978. – 225 с.
2. Бахвалов, Н.С. Численные методы: учебник / Н.С. Бахвалов. - Москва: Наука, 1975. -324 с.
3. Березкин, Е.Н. Курс теоретической механики: учебник / Е.Н. Березкин. 2-е изд. исправ. и доп. Москва: Изд. Московского ун-та, 1974. - 646 с.
4. Вяткин, А.В. Численная аппроксимация поля в задаче взаимодействия дипольных частиц: дис. ...канд.физ.-мат.наук: 05.13.18 / Вяткин Александр Владимирович. – Красноярск, 2010. – 132 с.
5. Захаров, А.Ю. Некоторые результаты сравнений эффективности методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений: Препринт № 125. / А.Ю. Захаров. – Москва: Изд. ИПМ АН СССР, 1979. – 25 с.
6. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела : учебное пособие / Ч. Киттель. - Москва: Наука, 1978. – 791 с.
7. Куреленко, О.Д. Краткий справочник по химии / О.Д. Куреленко. - 4-е изд., исправл. и доп. – Киев: Наукова думка, 1974. – 992 с.
8. Лабутин, А.А. Краткие сведения о международной системе единиц измерений (СИ) / А.А. Лабутин. - Киев: Вища школа, 1975. – 88 с.
9. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика в 10 т. Т.1:Механика. Электродинамика / Л.Д. Ландау Е.М. Лифшиц. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва: Наука, 1973. – 208 с.
10. Поляхов, Н.Н. Теоретическая механика/ Н.Н. Поляхов, С.А. Зегжда, М.П. Юшков; под ред. проф. Н.Н.Поляхова – Ленинград: изд-во Ленингр. ун-та, 1985. – 536 с.
11. Смайт, В. Электростатика и электродинамика / В.Смайт. Москва: Изд. Иностранной лит., 1954. - 606 с.

12. Тарасов, Л.В. Ветры и грозы в атмосфере Земли: Учебное пособие / Л.В. Тарасов – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. – 280 с.
13. Тиморева, А.В. Курс общей физики: Т.2 Электрические и электромагнитные явления / А.В. Тиморева, С.Э.Фриш. 9-е издание исправ. и доп. Москва: Физ.-мат., 1962. - 516 с.
14. Яковлев, В.И. Классическая электродинамика: Ч.1 Электричество и магнетизм.: Учеб.пособие / В.И. Яковлев. Новосибирск: Изд-во Новосиб. Ун-та, 2003. - 267 с.
15. Feynman, R.P. The Feynman Lectures on Physics: textbook / R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands. London, Addison-Wesley Publishing Company. Vol. 2., 1964. – 567 p.
16. Gregory, J.K. The water Dipole Moment in Water Clusters / J.K. Gregory, D.C. Clary, K. Liu., M.G. Brown, R.J. Saykally // Science – 1997. - Vol.275. - No. 5301. - P. 814-817.
17. HyperChem® Release 5.0: Reference Manual, 1996, 638 с.
18. Miyake, T. H-bond patterns and structure distributions of water octamer (H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub> at finite temperatures / T. Miyake , M. Aida // Chemical Physics Letters. - 2006. –No. 424. – P. 215-220.

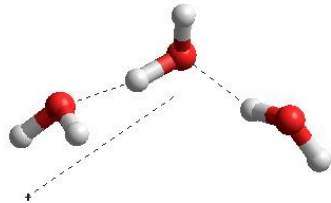
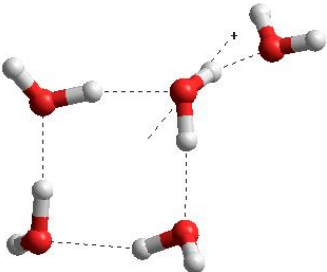
## ПРИЛОЖЕНИЕ А

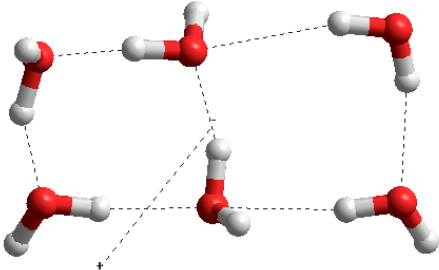
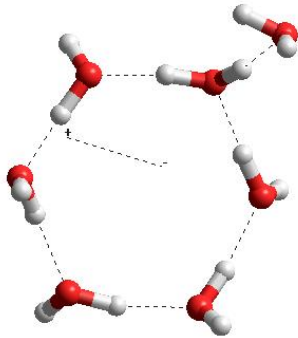
Конфигурация (с направлением дипольного момента)	Свойства при $T = 223K$	Начальные данные при $T = 223K$
	$m = 1.4995 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (28.975 \cdot 10^{-30}; 31.767 \cdot 10^{-30}; -4.0935 \cdot 10^{-30}),$ $p = 43.1909 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag}(54.2614; 922.891; 971.641).$ Полная энергия: $E = -992678.17 \text{ кДж/моль}.$ Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную: $\begin{pmatrix} 0.6426388 & -0.5818712 & -0.4984388 \\ 0.7558154 & 0.3748695 & 0.5368574 \\ -0.1255324 & -0.7217331 & 0.680693 \end{pmatrix}.$	$m = 14955 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (28975; 31767; -4093.5),$ $p = 43190.9 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag}(5426.14; 92289.1; 97164.1).$
	$m = 1.1964 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (15.3199 \cdot 10^{-30}; 18.6088 \cdot 10^{-30}; 0.1283 \cdot 10^{-30}),$ $p = 24.104 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag}(58.4325; 442.46; 467.458).$ Полная энергия: $E = -794185.198 \text{ кДж/моль}.$ Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:	$m = 11964 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (15319.9; 18608.8; 128.3),$ $p = 24104 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag}(5843.25; 44246; 46745.8).$

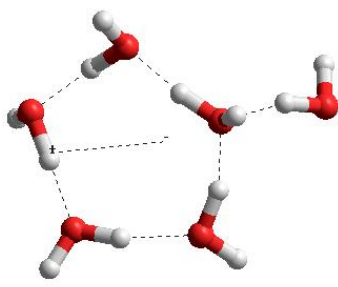
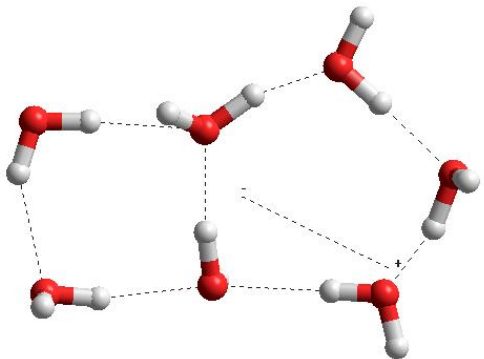
	$\begin{pmatrix} -0.3544697 & -0.9151283 & 0.1920713 \\ -0.8306374 & 0.2138378 & -0.5141155 \\ 0.4294095 & -0.3417799 & -0.835939 \end{pmatrix}.$	
	<p> <math>m = 1.7946 \text{ кг}</math>,  <math>\vec{p} = (40.6788 \cdot 10^{-30}; 43.1645 \cdot 10^{-30}; -7.1707 \cdot 10^{-30})</math>,  <math>p = 59.744 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}</math>,  <math>\tilde{J} = \text{diag} (48.6629; 1656.8; 1685.91)</math>.  Полная энергия:  <math>E = -1190956,6473 \text{ кДж/моль}</math>.  Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную: <math display="block">\begin{pmatrix} 0.6426388 &amp; -0.5818712 &amp; -0.4984388 \\ 0.7558154 &amp; 0.3748695 &amp; 0.5368574 \\ -0.1255324 &amp; -0.7217331 &amp; 0.680693 \end{pmatrix}.</math> </p>	<p> <math>m = 17946 \text{ кг}^*</math>,  <math>\vec{p} = (40678.8; 43164.5; -7170.7)</math>,  <math>p = 59744 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*</math>,  <math>\tilde{J} = \text{diag} (4866.29; 165680; 168591)</math>. </p>
	<p> <math>m = 1.7946 \text{ кг}</math>,  <math>\vec{p} = (-1.7561 \cdot 10^{-30}; 7.999 \cdot 10^{-30}; -0.73265 \cdot 10^{-30})</math>,  <math>p = 8.2223 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м}</math>,  <math>\tilde{J} = \text{diag} (268.52; 455.938; 714.727)</math>.  Полная энергия:  <math>E = -1191010.1059 \text{ кДж/моль}</math>.  Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную: </p>	<p> <math>m = 17946 \text{ кг}^*</math>,  <math>\vec{p} = (-1756.1; 7999; -732.65)</math>,  <math>p = 8222.3 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*</math>,  <math>\tilde{J} = \text{diag} (26852; 45593.8; 71472.7)</math>. </p>

	$\begin{pmatrix} -0.3335543 & -0.4686185 & -0.8180086 \\ -0.9392788 & 0.2393866 & 0.2458648 \\ 0.08060356 & 0.8503475 & -0.5200118 \end{pmatrix}.$	
	<p> <math>m = 2.0937 \cdot 10^{-25} \text{ кг},</math>  <math>\vec{p} = (-44.0088 \cdot 10^{-30}; 52.3439 \cdot 10^{-30}; -3.4837 \cdot 10^{-30}),</math>  <math>p = 68.4747 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},</math>  <math>\tilde{J} = \text{diag}(85.7702; 2347.62; 2409.58).</math> </p> <p>Полная энергия:  <math>E = -1389455.474 \text{ кДж/моль}.</math> </p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} 0.8190962 & -0.4462694 & -0.3604511 \\ 0.5389666 & 0.38348714 & 0.7499684 \\ -0.1964597 & -0.8085674 & 0.5546372 \end{pmatrix}.$	<p> <math>m = 20937 \text{ кг}^*,</math>  <math>\vec{p} = (-44008.8; 52343.9; -3483.7),</math>  <math>p = 68474.7 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,</math>  <math>\tilde{J} = \text{diag}(8577.02; 234762; 240958).</math> </p>



	$m = 8.979 \cdot 10^{-26} \text{ кг},$ $\vec{p} = (14.0791 \cdot 10^{-30}; 7.4755 \cdot 10^{-30}; -4.2565 \cdot 10^{-30}),$ $p = 16.4992 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (42.1236; 155.084; 193.272).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -595576.4937 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} -0.3205639 & -0.9165845 & 0.2389803 \\ -0.946868 & 0.3031322 & -0.1074795 \\ 0.02607132 & -0.2607367 & -0.9650579 \end{pmatrix}.$	$m = 89790 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (14079.1; 7475.5; -4256.5),$ $p = 16499.2 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (4212.36; 15508.4; 19327.2).$
	$m = 1.4955 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (5.8453 \cdot 10^{-30}; 4.6821 \cdot 10^{-30}; -12.5834 \cdot 10^{-30}),$ $p = 14.6435 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (182.229; 436.593; 530.165).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -992491.8616 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} 0.9432421 & -0.2494483 & 0.2192484 \\ 0.02566093 & 0.7129449 & 0.7007503 \\ -0.3311131 & -0.655351 & 0.6788808 \end{pmatrix}.$	$m = 14955 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (5845.3; 4682.1; -12583.4),$ $p = 14643.5 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (18222.9; 43659.3; 53016.5).$

	$m = 1.7946 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (-17.2965 \cdot 10^{-30}; 11.5677 \cdot 10^{-30}; -5.9171 \cdot 10^{-30}),$ $p = 21.6332 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (206.429; 665.421; 862.097).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -1190990.072 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} 0.9501322 & 0.305559 & 0.062311 \\ 0.2565308 & -0.6522202 & -0.7133025 \\ -0.1773155 & 0.6937163 & -0.6980809 \end{pmatrix}.$	$m = 17946 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (-17296.5; 11567.7; -5917.1),$ $p = 21633.2 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (20642.9; 66542.1; 86209.7).$
	$m = 2.0937 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (0.1298 \cdot 10^{-30}; 7.5071 \cdot 10^{-30}; -1.48 \cdot 10^{-30}),$ $p = 7.6526 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (475.649; 804.807; 1082.73).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -1389535.6348 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} -0.2552785 & -0.9134502 & 0.3169254 \\ -0.8927728 & 0.3485363 & 0.2854454 \\ -0.3712003 & -0.2100744 & -0.9044773 \end{pmatrix}.$	$m = 20937 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (0129.8; 7507.1; -1480),$ $p = 7652.6 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (47564.9; 80480.7; 108273).$

	$m = 1.7946 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (5.2966 \cdot 10^{-30}; 4.1048 \cdot 10^{-30}; 9.1287 \cdot 10^{-30}),$ $p = 11.3242 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (256.962; 484.321; 658.422).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -1191035.0672 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} -0.5177994 & 0.8364024 & 0.1797628 \\ -0.637704 & -0.2372883 & -0.7328217 \\ -0.5702782 & -0.4940903 & 0.6562449 \end{pmatrix}.$	$m = 17946 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (5296.6; 4104.8; 9128.7),$ $p = 11324.2 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (25696.2; 48432.1; 65842.2).$
	$m = 2.0937 \cdot 10^{-25} \text{ кг},$ $\vec{p} = (20.7241 \cdot 10^{-30}; -7.6079 \cdot 10^{-30}; -9.121 \cdot 10^{-30}),$ $p = 23.8865 \cdot 10^{-30} \text{ Кл} \cdot \text{м},$ $\tilde{J} = \text{diag} (325.173; 912.662; 1218.25).$ <p>Полная энергия:  <math>E = -1389503.1913 \text{ кДж/моль}.</math></p> <p>Матрица перехода от глобальной системы координат в локальную:</p> $\begin{pmatrix} 0.7549226 & -0.6556287 & 0.01558141 \\ -0.644536 & -0.7373437 & -0.2022315 \\ 0.1210999 & 0.1627119 & -0.9792138 \end{pmatrix}.$	$m = 20937 \text{ кг}^*,$ $\vec{p} = (20724.1; -7607.9; -9121),$ $p = 23886.5 \text{ Кл}^* \cdot \text{м}^*,$ $\tilde{J} = \text{diag} (32517.3; 91266.2; 121825).$